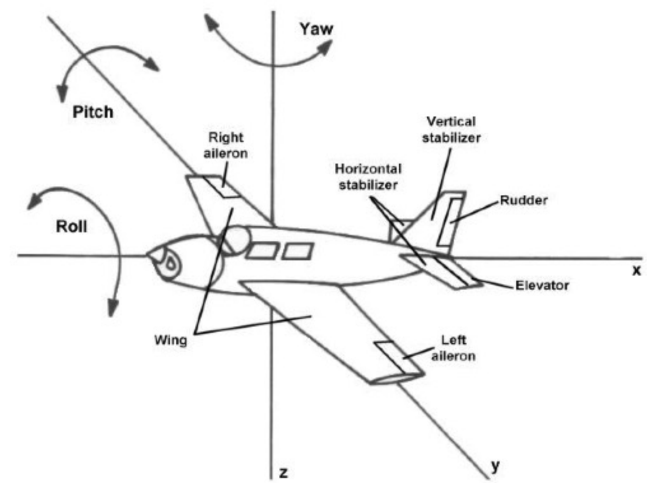
2º SEMESTRE: CÁLCULO NUMÉRICO CON FORTRAN.

TEMARIO:

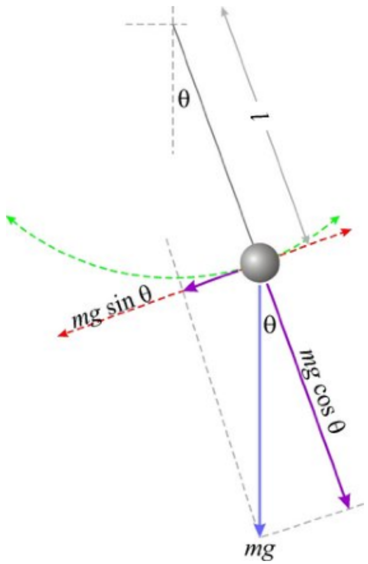
1. Sistemas lineales. Directos e iterativos.
2. Cálculo de autovalores.
3. Derivación e integración numérica.
4. Solución de ecuaciones y sistemas no lineales.
5. Solución numérica de ecuaciones diferenciales.

- Motivación:
  - Relevantes en ingeniería.
  - Entre otras aplicaciones, permiten el estudio de la estabilidad lineal de un sistema físico.



AUTOVALORES Y AUTOVECTORES

SISTEMA ESTABLE

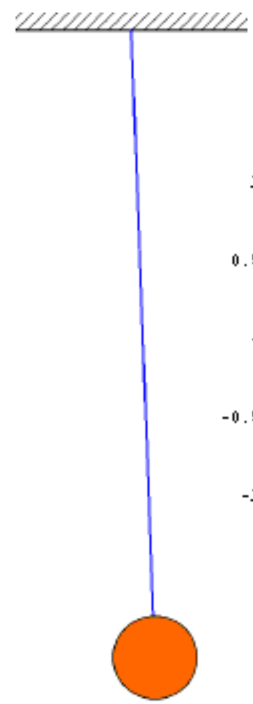


Movimiento del péndulo

$$F_t = -mg\sin\theta = ma_t$$

$$a_t = \ell\ddot{\theta}$$

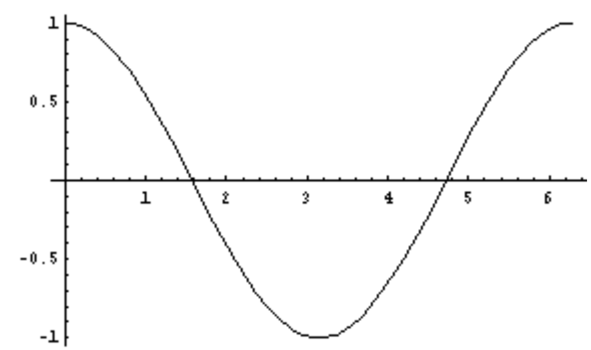
$$\ell\ddot{\theta} + g\sin\theta = 0$$



Hipótesis de movimiento pequeño

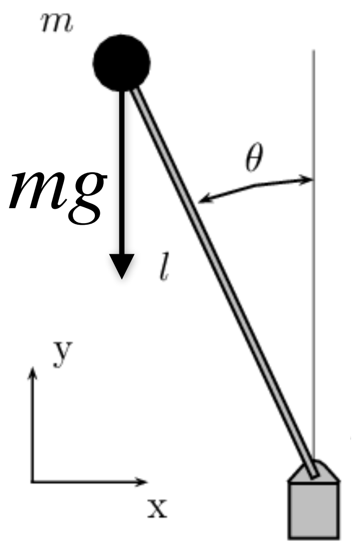
$$\ell\ddot{\theta} + g\theta = 0$$

$$\theta = c_2 \sin\left(\frac{\sqrt{g}t}{\sqrt{l}}\right) + c_1 \cos\left(\frac{\sqrt{g}t}{\sqrt{l}}\right)$$



$q(t)$

SISTEMA INESTABLE



Movimiento del péndulo

$$F_t = mg\sin\theta = ma_t$$

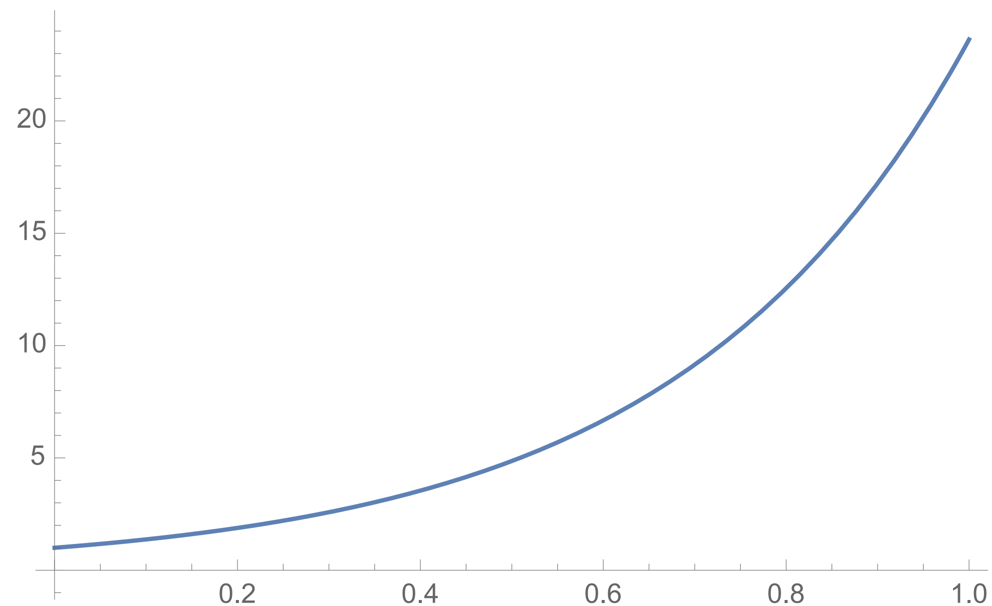
$$a_t = \ell\ddot{\theta}$$

$$\ell\ddot{\theta} - g\sin\theta = 0$$

Hipótesis de movimiento pequeño

$$\ell\ddot{\theta} - g\theta = 0$$

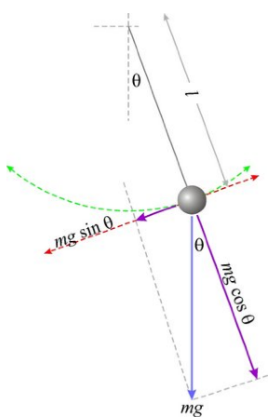
$$\theta = c_1 e^{\frac{\sqrt{g}t}{\sqrt{l}}} + c_2 e^{-\frac{\sqrt{g}t}{\sqrt{l}}}$$



» Motivación:

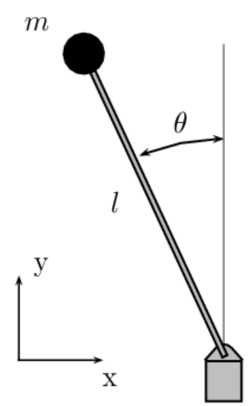
  » No es necesario encontrar la solución del problema para analizar su estabilidad.

  » Los autovalores del sistema nos dan esa información.



$$\ell\ddot{\theta} + g\theta = 0$$

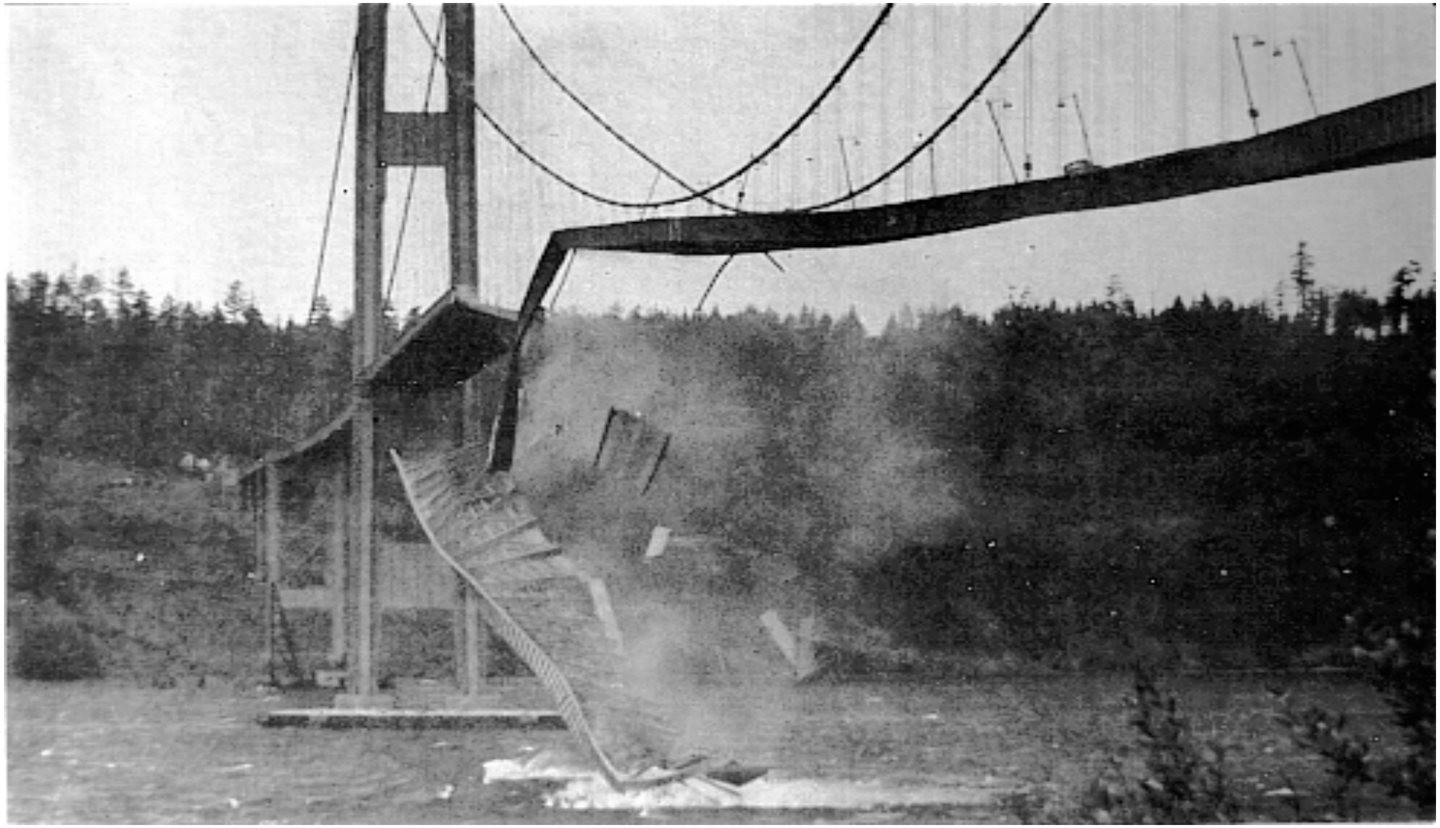
Autovalores de parte real negativa



$$\ell\ddot{\theta} - g\theta = 0$$

Autovalores de parte real positiva

Elasticidad y resistencia de materiales

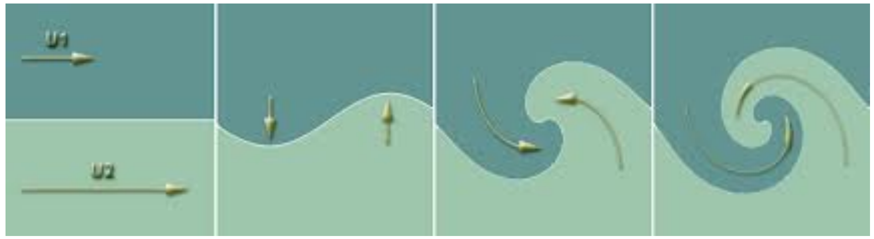


Puente de Tacoma

Resonancia:

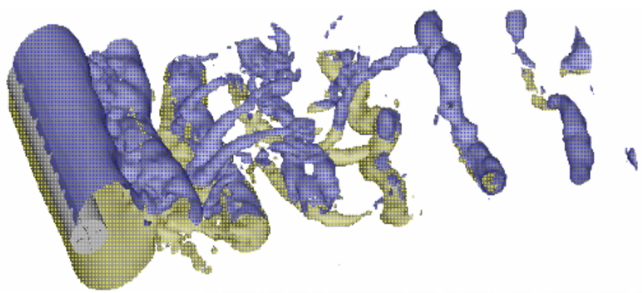
There are different kinds of instability:

Kelvin-Helmholtz

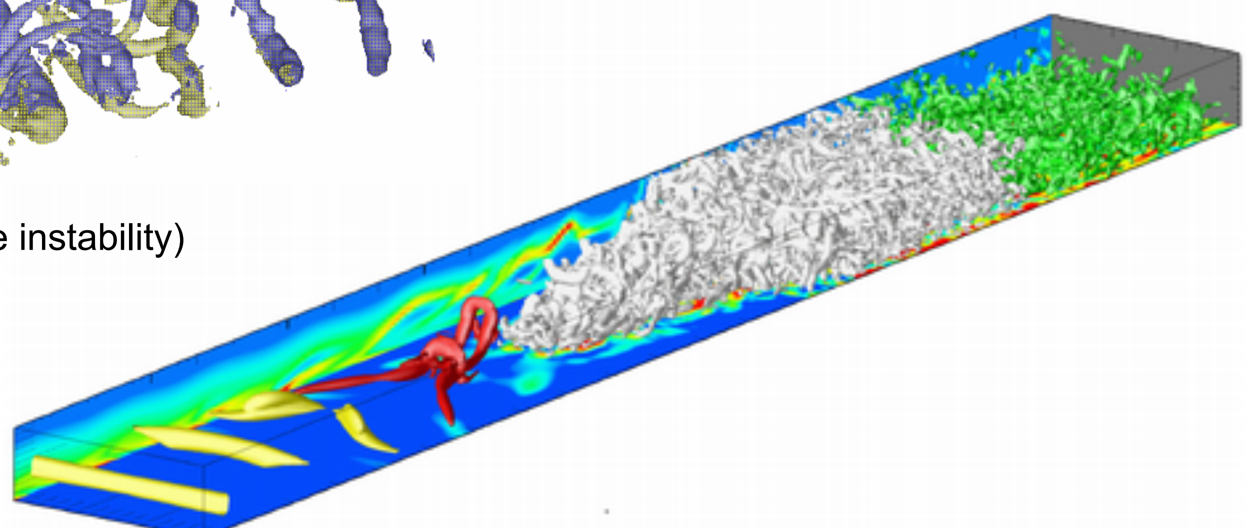


Rayleigh-Taylor

Wake instabilities



Tollmien-Schlichting (Streamwise instability)



…

AUTOVALORES Y AUTOVECTORES

Cálculo de Autovalores

Dada una matriz cuadrada $A \in M^{nxn}$

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

λ es un autovalor de A si existe $\vec{v} \in \mathbb{R}^n$, autovector correspondiente a λ tal que $A\vec{v} = \lambda\vec{v}$

AUTOVALORES Y AUTOVECTORES

Cálculo de Autovalores

$A \in M^{nxn}$ es diagonalizable si existe $B_V = \{\vec{v}_1, \vec{v}_2, \vec{v}_3, \ldots, \vec{v}_n\}$ base de $\mathbb{R}^n$ con

$$A\vec{v}_i = \lambda_i \vec{v}_i$$

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} & & \\ & Q & \\ & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \lambda_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} & & \\ & Q^{-1} & \\ & & \end{pmatrix}$$

Cálculo de Autovalores

La forma inmediata de calcular los autovalores de una matriz cuadrada pasa por hallar las raices del polinomio característico $p(\lambda)$.

- $A\vec{v}_i = \lambda_i \vec{v}_i \rightarrow (A - \lambda_i I)\vec{v}_i = 0.$ Sistema lineal homogéneo.

Para que tenga solución no trivial $(\vec{v}_i \neq \vec{0})$ es necesario que el rango de $(A - \lambda_i I)$ sea menor que el número de incognitas $(\mathrm{Rg}(A - \lambda_i I) = n - 1) \rightarrow |A - \lambda I| = 0.$

- Defino $|A - \lambda I| = p(\lambda) = 0.$

El problema se reduce a calcular las raices de un polinomio de grado n

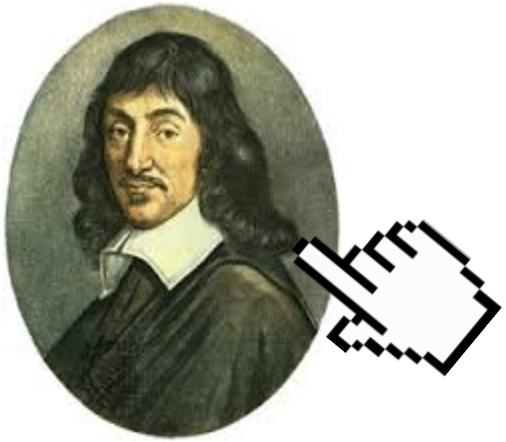
$$p(\lambda) = 0.$$

AUTOVALORES Y AUTOVECTORES

Cálculo de Autovalores

Analíticamente solo se conoce la fórmula para hallar las raíces hasta grado 4

Grado 3: Cardano



Grado 4: Descartes

Numericamente: ¿Newton?

AUTOVALORES Y AUTOVECTORES

Métodos que estudiaremos

- Potencia
- Potencia Inversa

Existen otros algoritmos (implementados en Lapack)

- Factorización QR

AUTOVALORES Y AUTOVECTORES

Método de la **potencia:**

Requisitos:

- $A \in M_{nxn}(\mathbb{R})$
- $\lambda_i \in \mathbb{R}$ para todo autovalor $A\vec{v}_i = \lambda_i \vec{v}_i$
- El conjunto de autovalores verifica $|\lambda_1| > |\lambda_2| > |\lambda_3| > \ldots\ldots > |\lambda_n|$

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 4 & 1 \\ 2 & 1 & 0 \\ -1 & 3 & 1 \end{pmatrix} \longrightarrow \quad \lambda_1 = 0; \quad \lambda_2 = -1; \quad \lambda_3 = 4;$$

AUTOVALORES Y AUTOVECTORES

Método de la **potencia:**

La existencia de n autovalores distintos garantiza la existencia de una base de $\mathbb{R}^n$ formada por autovectores.

$$B_V = \{\vec{v}_1, \vec{v}_2, \vec{v}_3, \ldots, \vec{v}_n\}$$

Para todo $\vec{q} \in \mathbb{R}^n$ se cumple $\vec{q} = c_1\vec{v}_1 + c_2\vec{v}_2 + c_3\vec{v}_3 + \ldots + c_n\vec{v}_n$

Entonces

$$A\vec{q} = c_1 A\vec{v}_1 + c_2 A\vec{v}_2 + c_3 A\vec{v}_3 + \ldots + c_n A\vec{v}_n =$$
$$= c_1\lambda_1\vec{v}_1 + c_2\lambda_2\vec{v}_2 + c_3\lambda_3\vec{v}_3 + \ldots + c_n\lambda_n\vec{v}_n$$

y por tanto

$$A^k\vec{q} = c_1\lambda_1^k\vec{v}_1 + c_2\lambda_2^k\vec{v}_2 + c_3\lambda_3^k\vec{v}_3 + \ldots + c_n\lambda_n^k\vec{v}_n =$$
$$= \lambda_1^k\left(c_1\vec{v}_1 + c_2\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^k\vec{v}_2 + c_3\left(\frac{\lambda_3}{\lambda_1}\right)^k\vec{v}_3 + \ldots + c_n\left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right)^k\vec{v}_n\right)$$

Método de la **potencia:**

como todos los autovalores son reales, distintos y ordenados por magnitud

$$\lim_{k \to \infty} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^k = 0 \qquad \forall i = 2, \ldots, n$$

Por tanto una buena aproximación de $\vec{v}_1$ se puede obtener mediante

$$\vec{v}_1 = \frac{A^k \vec{q}}{\left\| A^k \vec{q} \right\|}$$

El cálculo del autovalor asociado se hace mediante el llamado coeficiente de Rayleigh:

$$R(\vec{x}) = \frac{\vec{x}^T A \vec{x}}{\vec{x}^T \vec{x}} \rightarrow R(\vec{v}_1) = \frac{\vec{v}_1^{\,T} A \vec{v}_1}{\vec{v}_1^{\,T} \vec{v}_1} = \frac{\vec{v}_1^{\,T} \lambda_1 \vec{v}_1}{\vec{v}_1^{\,T} \vec{v}_1} = \lambda_1$$

Método de la **potencia: Algoritmo**

$1.-$ Escoger $\vec{q}_0 \in \mathbb{R}^n \quad \|\vec{q}_0\| = 1$

$2.-$ Proceso iterativo

```
do i = 1,max_iter
```

$$\vec{q}_i = A\vec{q}_{i-1}$$

$$\vec{q}_i = \vec{q}_i \,/\, \|\vec{q}_i\|$$

Evaluar error relativo

```
    if (error_relativo < tol) exit
enddo
```

$4.-$ Calcular el autovalor

AUTOVALORES Y AUTOVECTORES

Método de la **potencia: Problemas asociados**

Es un método simple y elegante pero….

1.- Sólo devuelve 1 autovalor/autovector

2.- Sólo devuelve el de mayor magnitud

3.- La convergencia solo está garantizada si el mayor no tiene multiplicidad.

4.- La velocidad de convergencia depende del cociente $\frac{\lambda_1}{\lambda_2}$

AUTOVALORES Y AUTOVECTORES

Método de la **potencia:**

A mano:

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -12 \\ 1 & -5 \end{pmatrix}$$

$$\vec{q}_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(1,1)$$

$$A\vec{q}_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 2 & -12 \\ 1 & -5 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -10 \\ -4 \end{pmatrix} \rightarrow \vec{q}_1 = \frac{-1}{\sqrt{29}}\begin{pmatrix} 5 \\ 2 \end{pmatrix}$$

$$A\vec{q}_1 = \begin{pmatrix} 2 & -12 \\ 1 & -5 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -5 \\ -2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 14 \\ 5 \end{pmatrix} \rightarrow \vec{q}_2 = \frac{1}{\sqrt{221}}\begin{pmatrix} 14 \\ 5 \end{pmatrix}$$

$$A\vec{q}_2 = \begin{pmatrix} 2 & -12 \\ 1 & -5 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 14 \\ 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -32 \\ -11 \end{pmatrix} \rightarrow \vec{q}_3 = \frac{-1}{\sqrt{1145}}\begin{pmatrix} 32 \\ 11 \end{pmatrix}$$

……

AUTOVALORES Y AUTOVECTORES

Método de la **potencia:**

Consideraciones:

•El signo no importa

$$A\vec{v}_i = \lambda_i \vec{v}_i \rightarrow A\left(-\vec{v}_i\right) = \lambda_i\left(-\vec{v}_i\right)$$

•La norma (magnitud) del autovalor tampoco

$$A\vec{v}_i = \lambda_i \vec{v}_i \rightarrow A\frac{\vec{v}_i}{\left\|\vec{v}_i\right\|} = \lambda_i \frac{\vec{v}_i}{\left\|\vec{v}_i\right\|} \rightarrow \frac{1}{\left\|\vec{v}_i\right\|} A\vec{v}_i = \frac{1}{\left\|\vec{v}_i\right\|}\lambda_i \vec{v}_i$$

$$\vec{q}_1 = \frac{-1}{\sqrt{29}}\begin{pmatrix}5\\2\end{pmatrix};\ \vec{q}_2 = \frac{1}{\sqrt{221}}\begin{pmatrix}14\\5\end{pmatrix};\ \vec{q}_3 = \frac{-1}{\sqrt{1145}}\begin{pmatrix}32\\11\end{pmatrix} \rightarrow \vec{q}_k \rightarrow \frac{1}{\sqrt{10}}\begin{pmatrix}3\\1\end{pmatrix}$$

AUTOVALORES Y AUTOVECTORES

Método de la **potencia:**

El autovalor asociado es:

$$R(\vec{x}) = \frac{\vec{x}^T A\vec{x}}{\vec{x}^T \vec{x}} \rightarrow R(\vec{q}_k) = \frac{(3,1)\begin{pmatrix} 2 & -12 \\ 1 & -5 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 3 \\ 1 \end{pmatrix}}{(3,1)\begin{pmatrix} 3 \\ 1 \end{pmatrix}} = \frac{(3,1)\begin{pmatrix} -6 \\ -2 \end{pmatrix}}{10} = -2 = \lambda$$

AUTOVALORES Y AUTOVECTORES

Método de la **potencia INVERSA:**

Generalización del método de la potencia

- Sea $A \in M_{nxn}(\mathbb{R})$ y $\lambda_i \in \mathbb{R}$ autovalores $A\vec{v}_i = \lambda_i \vec{v}_i \rightarrow$
  - $\dfrac{1}{\lambda_i} \in \mathbb{R}$ verifican $A^{-1}\vec{v}_i = \dfrac{1}{\lambda_i}\vec{v}_i$
- Ademas si los autovalores de A verifican $|\lambda_1| > |\lambda_2| > |\lambda_3| > ..... > |\lambda_n|$
  - $$\left|\frac{1}{\lambda_n}\right| > \left|\frac{1}{\lambda_{n-1}}\right| > .... > \left|\frac{1}{\lambda_2}\right| > \left|\frac{1}{\lambda_1}\right|$$

Método de la **potencia INVERSA:**

Generalización del método de la potencia

Para hallar el autovalor de magnitud más pequeña de A basta usar el método de la potencia sobre la matriz inversa.

$1.-$ Escoger $\vec{q}_0 \in \mathbb{R}^n \quad \left\|\vec{q}_0\right\| = 1$

$2.-$ Proceso iterativo

do i = 1,max_iter

DATO

$$\vec{q}_i = A^{-1}\vec{q}_{i-1} \rightarrow A\boxed{\vec{q}_i} = \boxed{\vec{q}_{i-1}}$$

¿?

Ax=b

¿GAUSS?

¿LU?

$$\vec{q}_i = \vec{q}_i / \left\|\vec{q}_i\right\|$$

enddo

Método de la **potencia INVERSA:**

Generalización del método de la potencia

Para hallar un autovalor en particular (en algunos procesos físicos se conocen con antelación) basta con construir la matriz $B = A - \mu I$ cuyos autovalores son $\{\lambda_1 - \mu, \lambda_2 - \mu, ..., \lambda_n - \mu\}$

Si queremos hallar el autovalor λ_j tomaremos $\mu = \lambda_j + \varepsilon$ y aplicaremos el método de la potencia inversa a la matriz $B = A - \mu I$

Métodos de cálculo de Autovalores: Práctica para todos los grupos

- Implementar método de la potencia y de la potencia inversa
- Comprobar que funciona con un problema sencillo del que se conozca previamente la solución

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -12 \\ 1 & -5 \end{pmatrix}$$

$$\vec{q}_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(1,1)$$

$$A\vec{q}_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 2 & -12 \\ 1 & -5 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -10 \\ -4 \end{pmatrix} \rightarrow \vec{q}_1 = \frac{-1}{\sqrt{29}}\begin{pmatrix} 5 \\ 2 \end{pmatrix}$$

$$A\vec{q}_1 = \begin{pmatrix} 2 & -12 \\ 1 & -5 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -5 \\ -2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 14 \\ 5 \end{pmatrix} \rightarrow \vec{q}_2 = \frac{1}{\sqrt{221}}\begin{pmatrix} 14 \\ 5 \end{pmatrix}$$

$$A\vec{q}_2 = \begin{pmatrix} 2 & -12 \\ 1 & -5 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 14 \\ 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -32 \\ -11 \end{pmatrix} \rightarrow \vec{q}_3 = \frac{-1}{\sqrt{1145}}\begin{pmatrix} 32 \\ 11 \end{pmatrix}$$

......

PRESENTACIÓN

- Estudiar el algoritmo de búsqueda de Google: “PageRank”.
- Explicarlo en clase y realizar una implementación en Fortran de un caso de ejemplo.

https://en.wikipedia.org/wiki/PageRank

https://math.stackexchange.com/questions/936757/why-is-pagerank-an-eigenvector-problem